

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОЕМКОСТИ ДЕКАГОНАЛЬНЫХ ФАЗ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА Al– Co–Ni

Сыроватко Ю.В.

Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара, г. Днепр, Украина

E-mail: yu.syrovatko@gmail.com

TEMPERATURE DEPENDENCE OF DECAGONAL QUASICRYSTALS HEAT CAPACITY OF THE Al–Co–Ni ALLOYS

Syrovatko Yu.V.

Oles' Honchar Dnipropetrovsk National University, Dnipro, Ukraine

Annotation. The heat capacity of decagonal quasicrystals of the Al–Co–Ni alloys was calculated in this work. For the quasicrystals, the linear “excessive” heat capacity is observed which means the deviation from the 3R Dulong-Petit value.

Возможность использования квазикристаллических сплавов в составе композиционных материалов предполагает исследование стабильности квазикристаллических фаз. Основной энергетической величиной, отображающей стабильность фаз, является теплоемкость. Сплав Al–Co–Ni имеет квазикристаллическую декагональную $Al_{69}Co_{21}Ni_{10}$ и кристаллическую $Al_9(Co,Ni)_2$ фазы. Вследствие особенностей строения декагональной квазикристаллической фазы, можно представить ее как слоистую структуру, в которой присутствует взаимодействие между слоями. Частота колебаний ω в данной системе отображается следующими дисперсионными законами [1]:

$$\omega^2 = u_z^2 k_z^2 + \gamma^2 \chi^4, \quad (1)$$

где u_z – скорость звуковых волн, связанная с колебаниями слоев относительно друг друга, γ – коэффициент, связанный с поперечной жесткостью слоев, k_z – волновой вектор, χ – коэффициент жесткости, равный $\chi^2 = k_x^2 + k_y^2$. Для свободной энергии F можно получить интегральное соотношение [1]

$$F = 4T \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \ln \left[1 - \exp \left(-\frac{\hbar}{T} \sqrt{u_z^2 k_z^2 + \gamma^2 \chi^4} \right) \right] \frac{V}{(2\pi)^3} 2\pi \chi d\chi dk_z, \quad (2)$$

где T – температура пропитки композиционного материала, V – объем, \hbar – постоянная Планка. Вычислив интеграл [2] и используя выражение для температуры Дебая θ и энергии $E = F + TS$ (S – энтропия фаз), нашли выражение для теплоемкости декагональной квазикристаллической фазы

$$C_V = 3R \left[1 + \frac{1}{12} \frac{\theta^2}{T^2} - \frac{3}{40} \frac{\theta^3}{T^3} \right]. \quad (3)$$

Энтропию фаз находили с помощью специальной компьютерной программы [3], основанной на сканировании цифровых фотографий фаз и построении распределений коэффициентов отражения света. Энтропия является функцией от среднеквадратичного отклонения полученной гауссианы. Согласно (3) теплоемкость

квазикристаллической декагональной фазы зависит от температуры. (рис.1). Теплоемкость же кристаллической фазы не зависит от температуры и согласно закону Дюлонга-Пти равна $3R$.

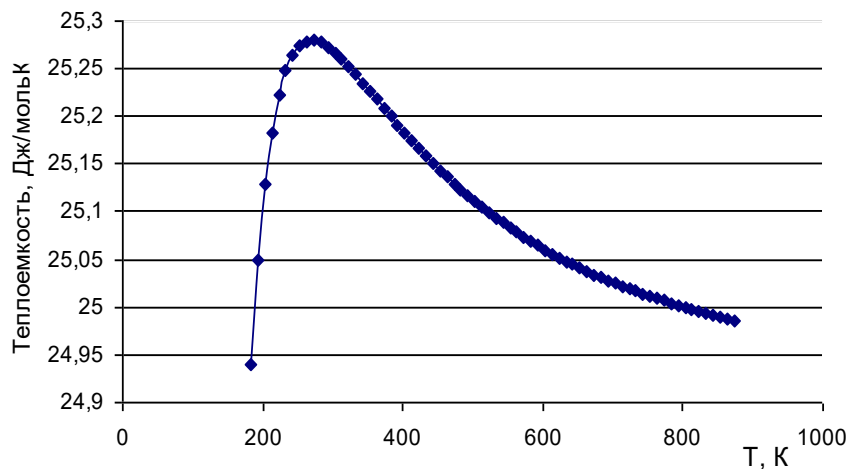


Рис. 1. Температурная зависимость теплоемкости квазикристаллической фазы сплава Al–Co–Ni.

Для вычисления количества связей N и, соответственно, степени стабильности фаз сплава Al–Co–Ni использовали равенства: $E = N\hbar\omega$, где ω – среднегеометрическая частота колебаний атомов фазы, N – количество колеблющихся осцилляторов фазы и $\omega = \frac{RTe}{N_a \hbar \exp\left(\frac{S}{C}\right)}$, где N_a – число Авогадро. Температуру Дебая квазикристал-

лической фазы вычисляли по формуле $\theta = \frac{\hbar}{k_b} \left(\frac{6\pi^2 N_a}{V} \right)^{\frac{1}{3}} v_s$, где V – объем моля вещества, v_s – скорость звука в веществе, k_b – константа Больцмана. После подстановки соответствующих значений теплоемкости и энтропии фаз, находили N . По полученным результатам для квазикристаллической фазы сплава Al–Co–Ni для одного моля вещества $N = 20,7 \cdot 10^{23}$, для кристаллической фазы $N = 14,2 \cdot 10^{23}$. Следовательно, наличие квазикристаллической фазы обеспечивает большую стабильность сплава Al–Co–Ni.

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Статистическая физика, Наука (1976).
2. Sukhova O.V., Syrovatko Yu.V., Journal of Physics and Electronics, 26(1), 35-38 (2018).
3. Башев В.Ф., Суховая Е.В., Сыроватко Ю.В., Строительство, материаловедение, машиностроение: Сб. науч. трудов, 64, 53-57 (2012).